

二维声子晶体带隙计算中的时域有限差分方法*

王 刚 温激鸿 韩小云 赵宏刚

(国防科技大学机电工程研究所,长沙 410073)

(2002年9月23日收到 2002年11月27日收到修改稿)

通过将各向同性介质动态弹性方程转化为一阶双曲型波动方程,采用交错网格法改进了 O(2 A) 的时域有限差分算法。进而将其应用于二维声子晶体带隙特性计算,理论计算结果和实验结果符合较好,证明该方法适用于声子晶体带隙特性的计算。

关键词: 声子晶体, 声子带隙, 时域有限差分, 交错网格

PACC: 4320, 4335, 0260, 8160H

1. 引言

量子阱^[1]、半导体超晶格^[2,3]等模拟实际晶体设计的相关材料与器件的成功应用,使电子能带理论突破了原有天然材料的限制,进入了一个新的阶段。近年来,模拟天然晶体原子排列的人造周期性复合结构中经典波(电磁波和弹性波)传播的研究受到广泛关注^[4-21]。介电常数(弹性常数)周期性分布的复合结构称为光子(声子)晶体^[4-7]。当电磁波(弹性波)在受到介电常数(弹性常数)的周期性调制时,可能会产生光子(声子)带隙,即一定频率范围的电磁波(弹性波)的传播被抑制或禁止。光子(声子)晶体的这种特性具有极大的理论价值和应用前景。

对于声子晶体,甚至在较为简单的各向同性介质中,也存在多种决定弹性波传播的参数(质量密度和两个拉梅常数),所以声子晶体带隙特性的研究较光子晶体更为复杂和具有丰富的物理内涵;另外声子晶体在无源隔音、精密机械平台减振、声滤波器等新型声学功能材料方面具有广泛的应用前景。因此,声子晶体带隙特性的研究正在成为一个新的热点^[8-21]。

现有的声子晶体带隙计算方法主要有平面波展开法(PWE)^[8-14]、多散射理论(MST)^[15-19]以及时域有限差分(FDTD)^[20,21]方法。PWE 方法应用最为广泛,易于理解,计算也相对简单,但只能处理无限大

周期结构中的带结构,不能计算有限结构的透射、反射等特性,而且在处理固液耦合时存在缺陷^[20]。MST 方法可以解决这些问题,但理论推导十分复杂,而且目前只限于处理球形单元结构的声子晶体,应用上存在局限。

本文采用的 FDTD 方法是基于对偏微分波动方程的离散化处理。通过时间和空间的离散化,将偏微分方程转化为差分方程,继而采用数值计算方法,求解波传播过程中各个离散点的所有振动参数与时间的函数关系。FDTD 方法不但可以计算周期结构中的带结构,而且可以计算有限结构的透射、反射等特性,不受固液耦合、结构形式等因素的影响。

FDTD 方法在地震波研究方面已经被广泛采用^[22-24],但在声子晶体带隙计算中的应用较少,值得深入研究。

2. 模型描述及基本方程

图 1 所示为二维声子晶体典型结构的横截面图,z 方向垂直于纸面向上。黑色的部分为基体材料中插入的圆柱,圆柱体平行于 z 轴周期排列,其间距 a 被称为晶格常数。

弹性波的传播方向平行于 x-y 平面,假设从 x=0 平面沿 x 轴正向传播。

从二维各向同性介质中的动态弹性方程开始,

$$\rho \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} = \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y},$$

* 国家重点基础研究发展规划(批准号 51307)资助的课题。

$$\begin{aligned}\rho \frac{\partial^2 u_y}{\partial t^2} &= \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y}, \\ \tau_{xx} &= (\lambda + 2\mu) \frac{\partial u_x}{\partial x} + \lambda \frac{\partial u_y}{\partial y}, \\ \tau_{yy} &= (\lambda + 2\mu) \frac{\partial u_y}{\partial y} + \lambda \frac{\partial u_x}{\partial x}, \\ \tau_{xy} &= \mu \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right),\end{aligned}\quad (1)$$

式中 (u_x, u_y) 为位移矢量, $(\tau_{xx}, \tau_{yy}, \tau_{xy})$ 为压应力和剪切应力, ρ 为密度, μ 和 λ 为拉梅常数.

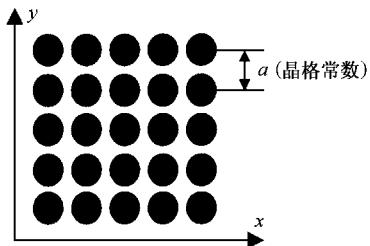


图 1 二维声子晶体模型结构

当假设初始时刻介质处于平衡状态, 即任一点的应力和速度都为 0 时, 应力和速度构成的波的传播等价于应力应变波的传播^[23]. 由此, 我们可以用速度矢量 (v_x, v_y) 替代位移矢量 (u_x, u_y) , 得到速度矢量表示的一阶双曲型波动方程组

$$\begin{aligned}\frac{\partial v_x}{\partial t} &= \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} \right), \\ \frac{\partial v_y}{\partial t} &= \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} \right), \\ \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial t} &= (\lambda + 2\mu) \frac{\partial v_x}{\partial x} + \lambda \frac{\partial v_y}{\partial y}, \\ \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial t} &= (\lambda + 2\mu) \frac{\partial v_y}{\partial y} + \lambda \frac{\partial v_x}{\partial x}, \\ \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial t} &= \mu \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial x} \right).\end{aligned}\quad (2)$$

设 \mathbf{W} 为速度和应力构成的向量, $\mathbf{W} = (v_x, v_y, \tau_{xx}, \tau_{yy}, \tau_{xy})^T$, 即有

$$\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial t} = A \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial x} + B \frac{\partial \mathbf{W}}{\partial y}, \quad (3)$$

式中, 系数

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \frac{1}{\rho} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\rho} \\ \lambda + 2\mu & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mu & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$B = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\rho} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\rho} & 0 \\ 0 & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda + 2\mu & 0 & 0 & 0 \\ \mu & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (4)$$

3. 交错网格 FDTD 算法实现

由于 $O(2A)$ 两阶时间精度、四阶空间精度的 FDTD 方法在精度和计算时间上综合较优^[22], 所以我们使用的是 $O(2A)$ 的交错网格 FDTD 算法.

3.1. 差分方程

首先将空间和时间离散化, $x = i\Delta x$, $y = j\Delta y$, $t = k\Delta t$. 设 $r_x = \frac{\Delta t}{\Delta x}$, $r_y = \frac{\Delta t}{\Delta y}$; U, V, R, T, H 依次为向量 \mathbf{W} 的各个分量 $v_x, v_y, \tau_{xx}, \tau_{yy}, \tau_{xy}$ 的离散值, 其中 $V_{i,j}^{k+\frac{1}{2}} = v_x [i\Delta x, j\Delta y, (k + \frac{1}{2})\Delta t]$, 其他类同; $\alpha = \frac{9}{8}$, $\beta = -\frac{1}{24}$ 为空间差分系数.

将偏微分方程离散化, 即可得到二维各向同性介质 $O(2A)$ 交错网格 FDTD 算法的递推公式如下:

$$\begin{aligned}U_{i,j}^{k+\frac{1}{2}} &= U_{i,j}^{k-\frac{1}{2}} + \frac{r_x}{\rho_{i,j}} \left[\alpha (R_{i+\frac{1}{2},j}^k - R_{i-\frac{1}{2},j}^k) \right. \\ &\quad \left. + \beta (R_{i+\frac{3}{2},j}^k - R_{i-\frac{3}{2},j}^k) \right] \\ &\quad + \frac{r_y}{\rho_{i,j}} \left[\alpha (H_{i,j+\frac{1}{2}}^k - H_{i,j-\frac{1}{2}}^k) \right. \\ &\quad \left. + \beta (H_{i,j+\frac{3}{2}}^k - H_{i,j-\frac{3}{2}}^k) \right], \\ V_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}} &= V_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{k-\frac{1}{2}} + \frac{r_x}{\rho_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}} \left[\alpha (H_{i+1,j+\frac{1}{2}}^k - H_{i,j+\frac{1}{2}}^k) \right. \\ &\quad \left. + \beta (H_{i+2,j+\frac{1}{2}}^k - H_{i-1,j+\frac{1}{2}}^k) \right] \\ &\quad + \frac{r_y}{\rho_{i,j}} \left[\alpha (T_{i+\frac{1}{2},j+1}^k - T_{i+\frac{1}{2},j}^k) \right. \\ &\quad \left. + \beta (T_{i+\frac{1}{2},j+2}^k - T_{i+\frac{1}{2},j-1}^k) \right],\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}R_{i+\frac{1}{2},j}^{k+1} &= R_{i+\frac{1}{2},j}^k + r_x (\lambda + 2\mu)_{i+\frac{1}{2},j} \left[\alpha (U_{i+1,j}^{k+\frac{1}{2}} - U_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}) \right. \\ &\quad \left. + \beta (U_{i+2,j}^{k+\frac{1}{2}} - U_{i-1,j}^{k+\frac{1}{2}}) \right] \\ &\quad + r_y \lambda_{i+\frac{1}{2},j} \left[\alpha (V_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}} - V_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}}) \right. \\ &\quad \left. + \beta (V_{i+\frac{1}{2},j+\frac{3}{2}}^{k+\frac{1}{2}} - V_{i+\frac{1}{2},j-\frac{3}{2}}^{k+\frac{1}{2}}) \right],\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 T_{i+\frac{1}{2},j}^{k+1} &= T_{i+\frac{1}{2},j}^k + r_x \lambda_{i+\frac{1}{2},j} \left[\alpha (U_{i+1,j}^{k+\frac{1}{2}} - U_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}) \right. \\
 &\quad \left. + \beta (U_{i+2,j}^{k+\frac{1}{2}} - U_{i-1,j}^{k+\frac{1}{2}}) \right] \\
 &\quad + r_y (\lambda + 2\mu)_{i+\frac{1}{2},j} \left[\alpha (V_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}} - V_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}}) \right. \\
 &\quad \left. + \beta (V_{i+\frac{1}{2},j+\frac{3}{2}}^{k+\frac{1}{2}} - V_{i+\frac{1}{2},j-\frac{3}{2}}^{k+\frac{1}{2}}) \right], \\
 H_{i,j+\frac{1}{2}}^{k+1} &= H_{i,j+\frac{1}{2}}^k + r_x \mu_{i,j+\frac{1}{2}} \left[\alpha (V_{i+\frac{3}{2},j+\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}} - V_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}}) \right. \\
 &\quad \left. + \beta (V_{i+\frac{1}{2},j+\frac{5}{2}}^{k+\frac{1}{2}} - V_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}}^{k+\frac{1}{2}}) \right] \\
 &\quad + r_y \mu_{i,j+\frac{1}{2}} \left[\alpha (U_{i,j+1}^{k+\frac{1}{2}} - U_{i,j}^{k+\frac{1}{2}}) \right. \\
 &\quad \left. + \beta (U_{i,j+2}^{k+\frac{1}{2}} - U_{i,j-1}^{k+\frac{1}{2}}) \right]. \quad (5)
 \end{aligned}$$

U, V, R, T, H 如图 2 所示, 在空间上交错分布, U, V 与 R, T, H 在时间上交错分布, 构成了交错的空间和时间网格.

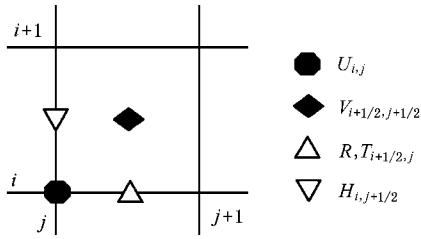


图 2 交错网格 FDTD 算法计算格点分布

通过给定初始的 $k = 0$ 时的 R, T, H 和 $k = -1/2$ 时的 U, V , 我们可以得到 $k = 1/2$ 时的 U, V . 继而得到 $k = 1$ 时的 R, T, H ……. 如此类推, 我们将会得到任意时刻任意点上的状态值.

比较文献 [20] 中的差分递推算法, 可以发现本文中的交错网格差分递推算法, 不需要进行任何插值处理, 这减少了累计误差, 计算精度和速度都可以得到提高.

为了保证算法的稳定性, 我们采用文献 [25] 的稳定性判据, 即

$$\Delta t \cdot c \cdot \sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2}} \leq 0.5, \quad (6)$$

式中速度 c 为计算对象中弹性波最快的传播速度.

另外, 取 $\Delta x, \Delta y < \frac{a}{40}$ 以保证足够的精度要求.

3.2. 边界条件

在用 FDTD 算法对声子晶体实际模型进行求解

时, 总需要在一个有限的空间区域内进行计算. 如果不对这个人为区域的边界进行特殊处理, 将会产生错误的波反射. 针对声子晶体的计算, 文献 [20] 采用了吸收边界条件和周期边界条件来进行处理, 但对于交错网格 FDTD 算法, 该方法使用很不方便. 因此我们采用了文献 [24] 中的吸收边界条件. 这种边界条件的递推公式和交错网格 FDTD 算法的递推公式形式相同, 容易实现且计算量增加不大.

3.3. 计算过程

为了得到声子晶体的传输特性, 我们可以在计算区域的一端 ($x = 0$ 平面) 赋予冲击激励的初始值, 通过计算得到计算区域另一端附近的速度随时间变化的函数关系. 再将其变换到频域, 与初始激励频谱作比较, 即可得到声子晶体的弹性波传输特性.

4. 实例计算结果

我们对一个 5 周期的声子晶体进行了实际计算. 结构形式如图 1, 参数按文献 [14] 选取. 圆柱体材料取 Duralumin(硬铝), 基体材料取 Epoxy(环氧树脂), 其材料特性如表 1 所示.

表 1 所用材料特性参数

材料	密度/g·cm ⁻³	纵波波速 C _L /m·s ⁻¹	横波波速 C _T /m·s ⁻¹
Duralumin	2.799	6342	3095
Epoxy	1.142	2569	1139

取晶格常数 $a = 20$ mm, 硬铝圆柱直径 $d = 16$ mm, 总体计算尺寸为 120 mm × 100 mm. 从 $t = 0$ 时刻开始, 在 $x = 0$ 平面上加载弹性平面波冲击激励 $v_x = \alpha \sin(\omega t) e^{-\beta \omega t^2}$. 这里 α 和 β 为常数, 选取合适的 α 和 β 产生足够窄的激励, 使其入射波的平直频谱足够宽(大于要分析的频率范围).

采用本文的交错网格 FDTD 算法递推计算每一时刻的波场, 最终可以得到 $x = 100$ mm 平面上由出射波引起的介质振动速度与时间的函数关系, 通过傅里叶变换并与入射激励波频谱作比较, 可以得到声子晶体的弹性波传输特性曲线如图 3(b) 所示.

图 3(a) 为文献 [14] 中的实验结果, 图 4 为采用平面波展开法 (PWE) 计算的带结构和 Γ -X 方向的态密度(文献 [14] 中的实验和本文中 FDTD 算法计算的都是 Γ -X 方向的禁带). 比较图 3 和图 4 可知: (1) 本文中所计算的声子晶体结构在 0—180 kHz 频

段、 Γ -X 方向共有 4 个带隙, 分别为 55.6—89.2 kHz, 97.2—104.8 kHz, 116.8—122.4 kHz, 167.2—170.4 kHz, 依次在图 3 和图 4 中用数字 1, 2, 3, 4 标出。(2) 交错网格 FDTD 算法很好地描述了声子晶体的带隙特性, 和 PWE 算法的计算结果十分相符合。(3) 交

错网格 FDTD 算法的计算结果和文献[14]中的实验结果符合较好。但是, 在 90 和 110 kHz 左右的理论计算结果有比实验结果大得多的峰值, 这是由于树脂对弹性波的高吸收率在理论计算中未加考虑的缘故。

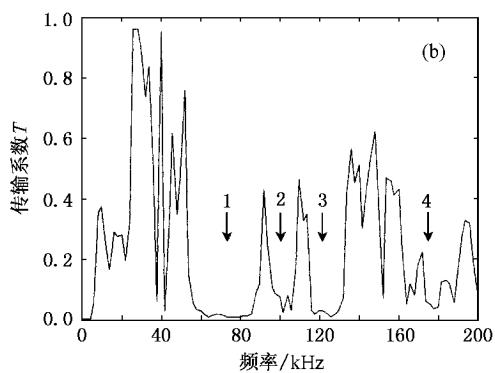
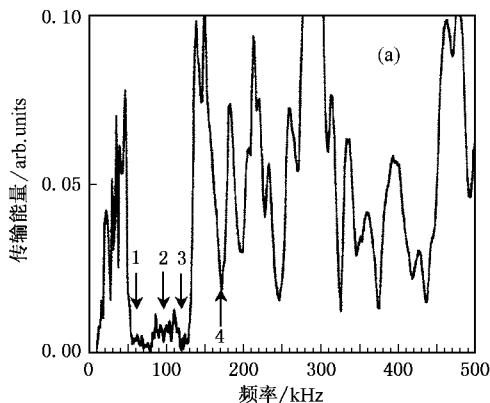


图 3 文献[14]中试验得到的传输系数与频率的关系图(a)和本文方法计算得到相同材料和结构的弹性波传输系数曲线(b)

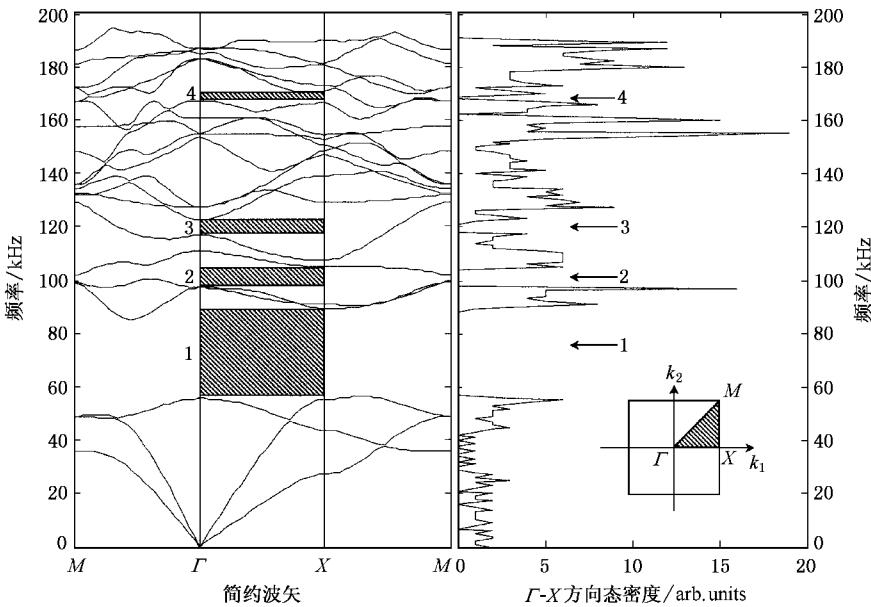


图 4 采用平面波展开法计算的带结构和 Γ -X 方向的态密度

5. 结 论

我们将改进的 FDTD 算法, 即交错网格 FDTD 算法成功地应用到二维声子晶体带隙特性计算中, 其理论计算结果和实验结果符合得比较理想。这种方

法也可以成功地应用于固体与固体、液体与液体、固体与液体组成的声子晶体结构的带隙特性计算。比较其他声子晶体带隙特性的计算方法, FDTD 算法可以形象直观地揭示声子晶体中弹性波传播的全过程。这一突出的特点将对声子晶体带隙产生机理的揭示起到重要的作用。

- [1] Li N *et al* 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 797 (in Chinese)[李娜 等 2000 物理学报 **49** 797]
- [2] Xu X H , Shen J 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 2142 (in Chinese)[徐晓虎, 沈剑 1999 物理学报 **48** 2142]
- [3] Jia Y *et al* 2002 *Chin. Phys.* **11** 58
- [4] Joannopoulos J D *et al* 1995 *Photonic Crystals* (Princeton :Princeton University Press)
- [5] Yablonovitch E 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2059
- [6] John S 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2486
- [7] Zhuang F *et al* 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 355 (in Chinese)[庄飞 等 2002 物理学报 **51** 355]
- [8] Wu F G , Liu Y Y 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1434 (in Chinese)[吴福根, 刘有延 2002 物理学报 **51** 1434]
- [9] Wu F G *et al* 2002 *J. Phys. D : Appl. Phys.* **35** 162
- [10] Wu F G *et al* 2001 *Chin. Phys. Lett.* **18** 785
- [11] Wu F G *et al* 2001 *Acta Acustica* **26** 319 (in Chinese)[吴福根 等 2001 声学学报 **26** 319]
- [12] Kushwaha M S *et al* 1994 *Phys. Rev. B* **49** 2313
- [13] Kushwaha M S *et al* 1993 *Phys. Rev. Lett.* **71** 2022
- [14] Vasseur J O *et al* 1998 *J. Phys. -Condens. Mat.* **10** 6051
- [15] Liu Z Y *et al* 2000 *Phys. Rev. B* **62** 2446
- [16] Liu Z Y *et al* 2000 *Science* **289** 1734
- [17] Modinos A *et al* 2001 *Physica B* **296** 167
- [18] Kafesaki M *et al* 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 6050
- [19] Kafesaki M , Economou E N 1999 *Phys. Rev. B* **60** 11993
- [20] Kafesaki M *et al* 2001 *Conference on Photonic Crystals and Light Localization in the 21st Century* (Dordrecht :Kluwer Academic Publishers Group)
- [21] García-Pablos D *et al* 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 4349
- [22] Johan O A R *et al* 1994 *Geophysics* **59** 1444
- [23] Virieux J 1986 *Geophysics* **51** 889
- [24] Dong L G 1999 *Oil Geophysical Prospecting* **34** 45 (in Chinese)[董良国 1999 石油地球物理勘探 **34** 45]
- [25] Jones D S 1994 *Methods in Electromagnetic Wave Propagation* (Oxford :Oxford University Press)

Finite difference time domain method for the study of band gap in two-dimensional phononic crystals^{*}

Wang Gang Wen Ji-Hong Han Xiao-Yun Zhao Hong-Gang

(Institute of Mechatronical Engineering , National University of Defense Technology , Changsha 410073 , China)

(Received 23 September 2002 ; revised manuscript received 27 November 2002)

Abstract

In this paper , by transforming the isotropy elastodynamic equations into the first-order hyperbolic ones , we have improved the $O(2\Delta)$ finite difference time domain method with the staggered grid. Using the approach in this paper , we calculated the band gap in two-dimensional phononic crystals. The calculated and measured results match well.

Keywords : phononic crystal , phononic band-gap , finite difference time domain , staggered grid

PACC : 4320 , 4335 , 0260 , 8160H

* Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No.51307).